

УДК 467

Академик НАН Армении Д.М. Седракян, А. Ж. Хачатрян

**Движение электрона в поле одномерного
случайного потенциала**

(Представлено 25/V 1999)

Как известно, задача движения квантовой частицы в поле одномерного случайного потенциала является одной из важных проблем теории переноса различных элементарных возбуждений в случайно-неоднородных средах. В связи с тем, что математические трудности, с которыми сталкивается задача вычисления средних кинетических характеристик двухмерных и трехмерных систем, являются значительными, особую важность имеют одномерные модели, допускающие точные решения и вместе с тем обладающие достаточной физической общностью (¹).

В данной работе рассматривается задача определения среднего сопротивления системы из конечного числа случайно расположенных случайных рассеивателей, когда параметры, характеризующие поле системы, являются независимыми друг от друга случайными переменными. Рассмотрим пространство реализаций случайного поля, имеющего общую форму вида

$$V(x) = \sum_{n=1}^N V_n(x - x_n), \quad (1)$$

где $V_n(x - x_n)$ неперекрывающиеся друг с другом и локализованные возле точек x_n одиночные потенциалы. Точки x_n образуют некоторую решетку, в которой расстояния $x_n - x_{n-1} (n = 2, 3, \dots, N)$ заданы случайным независимым друг от друга образом и имеют одинаковое среднее значение a ;

$$\langle x_n - x_{n-1} \rangle = a \text{ и } \int f(\Delta x_{n-1}) \Delta x_{n-1} d\Delta x_{n-1} = 0, \quad (2)$$

где $\Delta x_{n-1} = x_n - x_{n-1} - a$ и $f(\Delta x_{n-1})$ четная нормированная на единицу функция распределения случайной величины Δx_{n-1} .

Одиночные потенциалы $V_n(x)$ являются случайными независимыми функциями, одинаково распределенными, с плотностью распределения P в

некотором пространстве возможных реализаций E . Так например, среднее поле одиночного потенциала может быть записано в виде

$$\langle V_n(x) \rangle = \int_E P[V_n(x)] V_n(x) DV_n(x). \quad (3)$$

Модель неупорядоченной системы со случайным статическим полем (1)–(3) описывает большой класс систем с так называемым смешанным беспорядком, в которых сочетаются структурный беспорядок с композиционным. Так, случайные параметры Δx_{n-1} характеризуют структурный беспорядок системы, функции $V_n(x)$ – композиционный беспорядок. Физически важными частными случаями рассматриваемой модели являются всевозможные идеальные решетки, определяемые как системы, обладающие одновременно структурным и композиционным порядками.

Согласно эргодической гипотезе теории неупорядоченных систем средняя физическая величина, относящаяся к системе в целом, вычисляется как среднее по случайному полю, реализующемуся в объеме системы. Процедура усреднения физической величины по ансамблю возможных реализаций случайного поля (1)–(3) записывается в виде

$$\langle \rho_N \rangle = \int \cdots \int \rho_N f(\Delta x_1) \cdots f(\Delta x_{N-1}) P[V_1(x)] \cdots P[V_N(x)] \cdot d\Delta x_1 \cdots d\Delta x_N DV_1(x) \cdots DV_N(x). \quad (4)$$

В дальнейшем под ρ_N мы будем понимать сопротивление системы при нулевой температуре.

Для вычисления ρ_N воспользуемся формулой Ландауера, определяющей сопротивление системы конечных размеров как отношение коэффициентов отражения и прохождения электрона через потенциал системы ⁽²⁾

$$\rho = |R|^2 / |T|^2, \quad (5)$$

где R и T амплитуды отражения и прохождения электрона.

Как было показано в работе ⁽³⁾, задача определения R_N и T_N амплитуды отражения и прохождения электрона поля (1) в общем виде может быть сведена к задаче решения системы конечно-разностных уравнений

$$D_N = r_N / t_N \bar{D}_{N-1} e^{i2kx_N} + 1/t_N D_{N-1}, \quad (6a)$$

$$\bar{D}_N = r_N^* / t_N^* D_{N-1} e^{-i2kx_N} + 1/t_N^* \bar{D}_{N-1}, \quad (6b)$$

где $D_N = 1/T_N$ и $\bar{D}_N = R_N^* / T_N^*$. В коэффициентах уравнений (6a,б) параметры r_N и t_N соответствуют амплитудам отражения и прохождения одиночного потенциала $V_N(x)$. Отметим, что в (6) N есть величина переменная, так что $D_{N-1}, \bar{D}_{N-1}$ соответствуют первым $N-1$ потенциалам поля (1).

Вследствие сохранения плотности тока ($|T_N|^2 + |R_N|^2 = 1$) сопротивление системы может быть записано через величины $D_N, \bar{D}_N$ в виде

$$\rho_N = |D_N|^2 - 1 \text{ или } \rho_N = |\bar{D}_N|^2. \quad (7)$$

Прежде чем вычислять среднее сопротивление $\langle \rho_N \rangle$, введем вспомогательную величину

$$S_N = D_N \bar{D}_N^* e^{-2ikx_N}. \quad (8)$$

Тогда для величин ρ_N и S_N из (6)-(8) можно получить следующую систему разностных уравнений:

$$\rho_N = (2\alpha_N - 1)\rho_{N-1} + \beta_N^* \eta_{N-1}^* S_{N-1} + \beta_N \eta_{N-1} S_{N-1}^* + \alpha_N - 1, \quad (9a)$$

$$S_N = 2\gamma_N \rho_{N-1} + \chi_N \eta_{N-1}^* S_{N-1} + \delta_N \eta_{N-1} S_{N-1}^* + \gamma_N, \quad (9b)$$

где

$$\alpha_N = 1/|t_N|^2, \beta_N = r_N/|t_N|^2, \gamma_N = r_N/t_N^2, \delta_N = r_N^2/t_N^2, \quad (10)$$

$$\chi_N = 1/t_N^2, \eta_{N-1} = e^{i2k(a+\Delta x_{N-1})}.$$

Как видно, коэффициенты уравнений (9a), (9b) содержат параметры рассеяния только N -ого одиночного потенциала поля (1) и расстояние Δx_{N-1} . Так как по определению величины ρ_{N-1} и S_{N-1} зависят только от первых $N-1$ потенциалов системы и расстояний Δx_{n-1} ($n = 2, 3, \dots, N-1$), то при усреднении системы уравнений (9), согласно (4), все коэффициенты и соответствующие им переменные усредняются отдельно. Так например,

$$\langle (2\alpha_N - 1)\rho_{N-1} \rangle = \langle (2\alpha_N - 1) \rangle \langle \rho_{N-1} \rangle \text{ и т.д.}$$

Если ввести обозначения

$$\alpha = \langle \alpha_N \rangle, \beta = \langle \beta_N \rangle, \gamma = \langle \gamma_N \rangle, \delta = \langle \delta_N \rangle, \chi = \langle \chi_N \rangle, \eta = \langle \eta_{N-1} \rangle, \quad (11)$$

то усредненная по случайному полю (1)-(3) система уравнений (9) запишется в виде

$$\langle \rho_N \rangle = (2\alpha - 1)\langle \rho_{N-1} \rangle + \beta^* \eta^* \langle S_{N-1} \rangle + \beta \eta \langle S_{N-1}^* \rangle + \alpha - 1, \quad (12a)$$

$$\langle S_N \rangle = 2\gamma \langle \rho_{N-1} \rangle + \chi \eta^* \langle S_{N-1} \rangle + \delta \eta \langle S_{N-1}^* \rangle + \gamma. \quad (12b)$$

Система уравнений (12) позволяет в общем виде получить рекуррентные уравнения отдельно для $\langle \rho_N \rangle$ и $\langle S_N \rangle$. Так, расписывая (12a) для $\langle \rho_{N-1} \rangle, \langle \rho_{N-2} \rangle$ и (12b) для $\langle S_{N-1} \rangle, \langle S_{N-2} \rangle, \langle S_{N-3} \rangle$ и их комплексно сопряженных величин, мы получим систему из семи линейных неоднородных уравнений относительно величин $\langle \rho_N \rangle, \langle \rho_{N-1} \rangle, \langle \rho_{N-2} \rangle, \langle \rho_{N-3} \rangle, \langle S_{N-1} \rangle, \langle S_{N-2} \rangle,$

$\langle S_{N-3} \rangle, \langle S_{N-1}^* \rangle, \langle S_{N-2}^* \rangle, \langle S_{N-3}^* \rangle$. Исключая величины $\langle S \rangle$ из этих уравнений, получим уравнение для искомой величины $\langle \rho_N \rangle$ в виде

$$\langle \rho_N \rangle = A \langle \rho_{N-1} \rangle + B \langle \rho_{N-2} \rangle + C \langle \rho_{N-3} \rangle + D, \quad (13)$$

где

$$A = 2\alpha - 1 + \theta, B = 2d - v - (2\alpha - 1)\theta,$$

$$C = (2\alpha - 1)v + 2u, D = (\alpha - 1)(1 - \theta + v) + d - u$$

и $d = \beta^* \eta^* \gamma + \beta \eta \gamma^*, u = \Gamma^* \eta^* \gamma + \Gamma \eta \gamma^*, v = |\eta|^2 (|\chi|^2 - |\delta|^2),$

$$\Gamma = \eta^* (\chi \beta - \delta \beta^*), \theta = 2 \operatorname{Re}(\eta^* \chi).$$

Решение уравнения (13) можно искать в виде

$$\langle \rho_N \rangle = \sum_{j=1}^3 A_j x_j^N - 1/2. \quad (14)$$

Подставляя решение (14) в уравнение (13) получим характеристическое уравнение определяющее величины $x_j, j = 1, 2, 3$;

$$x_j^3 - A x_j^2 - B x_j - C = 0. \quad (15)$$

Коэффициенты A_j в решении (14) можно выразить через корни уравнения (15) x_j и $\langle \rho_2 \rangle, \langle \rho_1 \rangle$, разрешив систему уравнений

$$\begin{cases} A_1 + A_2 + A_3 = \frac{1}{2}, \\ A_1 x_1 + A_2 x_2 + A_3 x_3 = \rho_1 + \frac{1}{2}, \\ A_1 x_1^2 + A_2 x_2^2 + A_3 x_3^2 = \rho_2 + \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (16)$$

Входящие в (16) $\langle \rho_2 \rangle, \langle \rho_1 \rangle$ можно найти прямо из (4) и (6):

$$\langle \rho_1 \rangle = \alpha - 1, \langle \rho_2 \rangle = 2\alpha(\alpha - 1) + d. \quad (17)$$

Решение системы (16) дает

$$A_1 = \frac{2d - (2\alpha - 1)(x_2 + x_3 - 2\alpha - 1) + x_2 x_3}{(x_2 - x_1)(x_3 - x_1)}, \quad (18)$$

A_2 и A_3 получаются из (18) циклической перестановкой букв x_1, x_2, x_3 .

В конце заметим, что в случае структурного беспорядка для энергий электрона, для которых одиночный потенциал является безотражательным, т.е.

$$\alpha = 1, \beta = 0, \gamma = 0, \delta = 0, \chi = \langle \chi_N \rangle, \eta = \langle \eta_{N-1} \rangle, \quad (19)$$

$\langle \rho_N \rangle = 0$ для любого N . Это означает, что в одномерной структурно-неупорядоченной системе существуют делокализованные одноэлектронные состояния.

Авторы выражают благодарность профессору Д.А.Бадалян за обсуждение полученных результатов.

Ереванский государственный университет
Государственный инженерный университет Армении

Հայաստանի ԳԱԱ ակադեմիկոս Դ. Մ. ՍԵՂՐԱԿՅԱՆ, Ա. Ժ. ԽԱՇԱՏՐՅԱՆ

Էլեկտրոնի շարժումը միաչափ պատահական պոտենցիալի
դաշտում

Հաշված է միաչափ վերջավոր թվով պատահական դասավորվածություն ունեցող պատահական պոտենցիալներից բաղկացած ցանցի դիմադրությունը:

ЛИТЕРАТУРА – ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

¹ I.M.Lifshits, S.A.Gredeskul, L.A.Pastur, Introduction to the Theory of Disordered Systems. Wiley, Now York, 1988. ² P.W.Anderson, D.J.Thouless, E.Abrahams et al., Phys. Rev., v. B22, p.3519 (1980). ³ Д.М.Седракян, А.Ж.Хачатрян, ДНАН Армении, т.98, №4, с.301-306 (1998).